

[XV1-W-MP] КОМП'ЮТЕРНІ ТЕХНОЛОГІЇ В ПРОЦЕСАХ НЕОРГАНІЧНИХ ВИРОБНИЦТВ



Робоча програма навчальної дисципліни (Силабус)

Реквізити навчальної дисципліни

Рівень вищої освіти	Другий (магістерський)
Галузь знань	16 - Хімічна інженерія та біоінженерія
Спеціальність	161 - Хімічні технології та інженерія
Освітня програма	Всі ОП
Статус дисципліни	Вибіркова (Ф-каталог)
Форма здобуття вищої освіти	Очна
Рік підготовки, семестр	Доступно для вибору починаючи з 1-го курсу, весняний семестр
Обсяг дисципліни	5 кред. (Лекц. 18 год, Практ. год, Лаб. 36 год, СРС. 96 год)
Семестровий контроль/контрольні заходи	Залік
Розклад занять	https://rozklad.kpi.ua
Мова викладання	Українська
Інформація про керівника курсу / викладачів	Лекц.: Концевой С. А. , Лаб.: Концевой С. А. , СРС.: Концевой С. А.
Розміщення курсу	https://docs.google.com/document/d/1JUbudOPiGZCoaZjWaFSv2zdxE9RFqOYiTSuAHk8Uh4M/edit?usp=sharing

Програма навчальної дисципліни

1. Опис навчальної дисципліни, її мета, предмет вивчення та результати навчання

Аналіз перебігу хіміко-технологічних процесів і визначення параметрів реакторів неможливі без інтенсивного використання комп'ютерів та різноманітного програмного забезпечення. Це потребує від користувачів не тільки вільного володіння стандартними програмами, а й здатності до створення власних програмних продуктів в різних середовищах. Алгоритмізація і

програмування дають досвід інтенсивної інтелектуальної діяльності, ефективність якої майбутні хіміки-технологи можуть оцінити самостійно (працює програма як треба чи ні). Освітня компонента «Комп'ютерні технології в процесах неорганічних виробництв» призначена активувати застосування студентами персональних комп'ютерів в навчальному процесі і, зокрема, при виконанні курсових проектів і робіт та магістерської дисертації, поглибити знання і вміння студентів проводити розрахунки в середовищі VBA-Excel та Python-GoogleColab. Необхідність розробки нових алгоритмів та застосування сучасних методів обробки даних сприятиме більш якісному засвоєнню студентами технологічних аспектів відповідного процесу. При вивченні цієї освітньої компоненти студенти одержують конкретні фахові знання і вміння з методології побудови алгоритму розрахунку конкретного процесу або об'єкту та реалізації алгоритму в указаних середовищах. Модуль передбачає послідовну і систематичну реалізацію алгоритмів і програм у взаємозв'язку з виконанням індивідуальних завдань технологічного характеру і домашньої контрольної роботи.

Предмет освітньої компоненти: Математичне моделювання процесів у виробництві неорганічних речовин та комп'ютерні засоби його реалізації.

Метою освітньої компоненти є формування у студентів наступних здатностей.

Програмні компетентності

ЗК1. Здатність генерувати нові ідеї (креативність).

ЗК2. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях.

ЗК3. Здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел.

ФК4. Здатність досліджувати, класифікувати і аналізувати показники якості хімічної продукції, технологічних процесів і обладнання хімічних виробництв.

ФК7. Здатність використовувати сучасне спеціальне наукове обладнання та програмне забезпечення при проведенні експериментальних досліджень і здійсненні дослідно-конструкторських розробок у сфері хімічних технологій та інженерії

Програмні результати навчання

ПРН1. Критично осмислювати наукові концепції та сучасні теорії хімічних процесів та хімічної інженерії, застосовувати їх при проведенні наукових досліджень та створенні інновацій.

ПРН2. Здійснювати пошук необхідної інформації з хімічної технології, процесів і обладнання виробництв хімічних речовин та матеріалів на їх основі, систематизувати, аналізувати та оцінювати відповідну інформацію.

ПРН7. Здійснювати у науково-технічній літературі, патентах, базах даних, інших джерелах пошук необхідної інформації з хімічної технології, процесів і обладнання виробництв хімічних речовин та матеріалів на їх основі, систематизувати, і аналізувати та оцінювати відповідну інформацію

Після засвоєння навчальної дисципліни студенти мають продемонструвати такі результати навчання:

знання:

- можливостей ПК в вирішенні розрахункових проблем процесів неорганічних виробництв;
- можливостей пакетів Excel та онлайн середовища Google Colab стосовно рішення математичних моделей різної складності;

- послідовності розробки алгоритму та відповідної програми розрахунку матеріального, теплового балансів конкретного виробництва, методик розрахунків кінетики хімічного процесу та параметрів допоміжних апаратів.

уміння:

- змінити і доповнити алгоритми і програми кафедри ТНР, В та ЗХТ відповідних розрахунків з тем комп'ютерних занять;
- розробити індивідуально власні програми розрахунків з теми комп'ютерних занять;

досвід:

- використання методів комп'ютерного моделювання та оптимізації.

2. Пререквізити та постреквізити дисципліни (місце в структурно-логічній схемі навчання за відповідною освітньою програмою)

Навчальний матеріал освітньої компоненти «Комп'ютерні технології в процесах неорганічних виробництв» базується на знаннях і вміннях, отриманих при навчанні за бакалаврською програмою підготовки. Вимагаються базові знання середовища Excel та основних технологій неорганічних речовин. Освітні компоненти, які базуються на результатах навчання: Спеціальні дисципліни магістерської підготовки, виконання курсових проектів і робіт, виконання і підготовка до захисту магістерської дисертації.

3. Зміст навчальної дисципліни

Тема 1. Застосування вбудованих можливостей електронних таблиць для задач Хімічної технології.

Тема 2. Застосування програмування на VBA для розширення можливостей електронних таблиць.

Тема 3. Використання мови Python у середовищі Google Colab для задач Хімічної технології.

Тема 4. Машинне навчання та аналіз даних у середовищі Google Colab зі застосуванням low-code бібліотеки PyCaret.

4. Навчальні матеріали та ресурси

Базова:

1. Комп'ютерні технології у процесах неорганічних виробництв (друге видання, доповнене і перероблене).. [Електронний ресурс] : підручник для студ. спеціальності 161 «Хімічні технології та інженерія», А.Л. Концевой, С.А. Концевой - НТУУ «КПІ», 2023. – 238 с. Гриф надано Вченою радою КПІ ім. Ігоря Сікорського, протокол №6 від 03.10.2022 р. Привласнено ідентифікатор бібліотеки КПІ: <https://ela.kpi.ua/handle/123456789/>

2. Методи розрахунків у технології неорганічних виробництв (т.1. Зв'язаний азот): підручник / О. Я. Лобойко, Л. Л.Товажнянський, І. О. Слабун та ін. – Х.: НТУ “ХПІ”, 2001. 512 с. - ISBN 966-593-236-5.

Додаткова:

1. Курс лекцій "Комп'ютерні технології у процесах неорганічних виробництв". URL: https://youtube.com/playlist?list=PLYJP3shlhejN_3LfL0_WHXuebyTr5saE0&si=itN4decMj0kMhY_g

2. Experimentation for Improvement. URL: <https://www.coursera.org/learn/experimentation>

3. The Power of a Mind to Map: Tony Buzan at TEDxSquareMile. URL: <https://youtu.be/nMZCghZ1hB4?si=z5EpCvLereCI3UA2>
4. Уроки Python для початківців / Програмування на Пітон з нуля. URL: <https://youtube.com/playlist?list=PL7vq4D0vOpQb-nious5dTzUF9GEMp6jiL&si=9M0VeFPsBUyZdMVd>
5. Python for Beginners Tutorial. URL: <https://youtu.be/b093aqAZiPU?si=IUvO1lsxZ6emA7S8>
6. Optimization with Python. URL: <http://apmonitor.com/che263/index.php/Main/PythonOptimization>
7. Quick tour of PyCaret (a low-code machine learning library in Python). URL: <https://youtu.be/4Rn4YMLUjGc?si=fIOXKRAFSJRtMeBt>
8. Курс «AI-ML-DS Training» від Kaggle Grandmaster (GM) Мокіна В. Б. URL: <https://youtube.com/playlist?list=PL4DHq-xU-ebUiB6T6vjd0SoDha4G0m8zV&si=UDYZkhRjZ7bgbx5>

Навчальний контент

5. Методика опанування навчальної дисципліни (освітнього компонента)

ЛЕКЦІЇ

№	Дата	Опис заняття
1	1 тиждень навчання	Вступ. Призначення освітньої компоненти, зв'язок з іншими дисциплінами. Вимоги до оформлення індивідуального завдання. Основи роботи з Google Docs та ревізія основ роботи в середовищі Excel ("Підбір параметру").
2	3 тиждень навчання	"Пошук рішення" (Excel) для розрахунків матеріальних балансів та оптимізації параметрів хіміко-технологічних схем (ХТС).
3	5 тиждень навчання	Універсальна методика (УМ) розрахунку ХТС. VBA-Excel та Python (Google Colab) реалізації.
4	7 тиждень навчання	Розрахунок схеми синтезу аміаку у 3-х варіантах. Ітераційні розрахунки при розв'язку матеріального балансу.
5	9 тиждень навчання	Моделювання хімічних реакторів та вища математика у Google Colab.
6	11 тиждень навчання	Регресійний аналіз у Google Colab. ChatGPT для автоматичної генерації кода на Python
7	13 тиждень навчання	Машинне навчання та аналіз даних у середовищі Google Colab зі застосуванням low-code бібліотеки PyCaret.
8	15 тиждень навчання	Статистичні параметри оцінки моделей, що обираються бібліотекою PyCaret.
9	17 тиждень навчання	Основи роботи у середовищі Kaggle. Практика опанування задач машинного навчання та оптимізації параметрів будь-яких процесів.

ЛАБОРАТОРНІ КОМП'ЮТЕРНІ ЗАНЯТТЯ

Тиждень	Тема	Опис запланованої роботи
1,2	Основи роботи з Google Docs та ревізія основ роботи в середовищі Excel.	Створення власного Звіту у Google Docs та плейлисту відеозвіту на youtube. Ревізія основних положень з роботи в середовищі Excel: багатоваріантні розрахунки, Підбір параметру. Розрахунок рівноваги оборотних реакцій – рішення нелінійних рівнянь на прикладі синтезу аміаку.

3,4	“Пошук рішення” (Excel) для розрахунків матеріальних балансів та оптимізації параметрів хіміко-технологічних схем (ХТС)	Функція “Лінейн” та “Пошук рішення” у VBA-Excel. Визначення стехіометричних коефіцієнтів хімічних реакцій та оптимізація їх параметрів (вихід продукту) з надбудовою “Пошук рішення”.
5,6	Універсальна методика (УМ) розрахунку ХТС. VBA-Excel та Python (Google Colab) реалізації.	Реалізація Універсальної методики розрахунку ХТС у середовищі VBA-Excel та Python (Google Colab) на прикладі одно- та дво-ступеневого осмосу.
7,8	Розрахунок схеми синтезу аміаку у 3-х варіантах. Ітераційні розрахунки при розв’язку матеріального балансу.	Застосування УМ ХТС для розрахунку параметрів схеми синтезу аміаку у 3-х варіантах: Excel, Excel-VBA, Python.
9,10	Моделювання хімічних реакторів та вища математика у Google Colab.	Рішення системи диференціальних рівнянь у Python. для моделювання концентрації реагентів і продуктів реакції в залежності від часу та типу реактору (PIB і PI3п, PI3). Інтегрування та диференціювання символічне (визначення оптимальної температури екзотермічної зворотної реакції) та числове (визначення об’єму каталізатору) для реактору окиснення SO ₂ в SO ₃ .
11,12	Регресійний аналіз у Google Colab. ChatGPT для автоматичної генерації кода на Python	Моделювання залежності ступеня перетворення від параметрів режиму роботи реактору. Формування запитів для ChatGPT та отримання коду на Python для виконання у середовищі Google Colab.
13,14,15	Машинне навчання та аналіз даних у середовищі Google Colab зі застосуванням low-code бібліотеки PyCaret.	Машинне навчання моделі класифікації і регресії та їх реалізація з використанням low-code бібліотеки PyCaret. Застосування навчених у PyCaret моделей у Google Colab.
16	Статистичні параметри оцінки моделей, що обираються бібліотекою PyCaret.	Порівняльний аналіз результатів моделювання з вихідними даними процесу синтезу аміаку (на основі багатоваріантного розрахунку системи нелінійних рівнянь). Оцінка впливу на результат моделювання різних статистичних характеристик.
17,18	Основи роботи у середовищі Kaggle. Практика опанування задач машинного навчання та оптимізації параметрів будь-яких процесів. МКР.	Реєстрація на платформі Kaggle. Участь у змаганні із задачі класифікації та регресії з використанням бібліотеки PyCaret. Виконання задачі з регресії (18 заняття) зараховується як МКР.

6. Самостійна робота студента

Самостійна робота студента (СРС) в кількості 96 годин впродовж семестру включає повторення лекційного матеріалу шляхом графічного конспектування, складання попередніх варіантів програм для проведення розрахунків на заняттях, завершення роботи поза комп’ютерним класом, виконання і оформлення домашньої контрольної роботи (ДКР), підготовка до модульної контрольної роботи (МКР) і заліку. Рекомендована кількість годин, яка відводиться на виконання зазначених видів робіт:

Вид СРС

Кількість годин на підготовку

Підготовка до аудиторних занять: повторення лекційного матеріалу, складання попередніх варіантів програм для проведення розрахунків на заняттях, доопрацювання програм на домашніх комп'ютерах	76 годин
Виконання ДКР	12 годин
Підготовка до МКР	2 години
Підготовка до заліку	6 годин

Політика та контроль

7. Політика навчальної дисципліни (освітнього компонента)

У звичайному режимі роботи університету лекції та лабораторні роботи проводяться в навчальних аудиторіях. У змішаному режимі лекційні заняття проводяться через платформу дистанційного навчання Сікорський, лабораторні роботи – у комп'ютерній лабораторії 157-4. У дистанційному режимі всі заняття проводяться через платформу дистанційного навчання Сікорський. Відвідування лекцій та лабораторії є обов'язковим.

На початку кожної лекції проводиться опитування за матеріалами попередньої лекції із застосуванням інтерактивних засобів, наприклад, Google Forms. Перед початком чергової теми лектор може надсилати питання із застосуванням інтерактивних засобів з метою визначення рівня обізнаності здобувачів за даною темою та підвищення зацікавленості.

Правила призначення заохочувальних та штрафних балів:

1 За модернізацію робіт нараховується від 1 до 3 заохочувальних балів;

2 За виконання завдань із удосконалення дидактичних матеріалів з дисципліни нараховується від 1 до 3 заохочувальних балів;

Політика дедлайнів та перескладань: визначається п. 8 Положення про поточний, календарний та семестровий контроль результатів навчання в КПІ ім. Ігоря Сікорського

Політика щодо академічної доброчесності: визначається політикою академічної чесності та іншими положеннями Кодексу честі університету.

8. Види контролю та рейтингова система оцінювання результатів навчання (PCO)

Види контролю встановлюються відповідно до Положення про поточний, календарний та семестровий контроль результатів навчання в КПІ ім. Ігоря Сікорського:

1. Поточний контроль: опитування на лекціях, виконання лабораторних робіт.
2. Календарний контроль: проводиться двічі на семестр як моніторинг поточного стану виконання вимог силабусу.
3. Семестровий контроль: залік.

Рейтингова система оцінювання результатів навчання

1. Рейтинг студента з дисципліни розраховується виходячи із 100-бальної шкали. Стартовий рейтинг (протягом семестру) складається з балів, що студент отримує за:

1. Розробка графічного конспекту лекцій;

2. Виконання та захист 17 лабораторних робіт;
3. Одну модульну контрольну роботу;
4. Одну домашню контрольну роботу.

2. Критерії нарахування балів:

2.1 Розробка конспекту з тем лекційних занять

Ваговий бал – 2. Максимальна кількість балів:

$$r_{\text{лек}} = 2 \text{ бали} \cdot 9 = 18 \text{ балів.}$$

Кожен конспект включає графічну частину (до 1 балу) виконану від руки (або у спеціальній програмі) у форматі інтелектуальних карт (Mind Map). Цей конспект дозволяє відповісти на 5-10 питань до кожної лекції (див. Перелік питань до лекцій у дистанційному курсі, сумарно до 90 питань).

2.2 Робота на лабораторних заняттях:

Ваговий бал – 3. Максимальна кількість балів дорівнює:

$$r_{\text{лаби}} = 3 \text{ бали} \cdot 17 = 51 \text{ бал.}$$

Захист роботи виконується у форматі відеозвіту (близько 5-ти хвилин) зі створенням плейлисту всіх робіт на власному каналі на youtube.com.

Критерії оцінювання:

3 бали: безпомилкове виконання та оформлення завдання (розрахунку);

2 бали: вірне в цілому рішення з незначними недоліками в оформленні, або похибками окремих елементів розрахунку;

1 бал: виконання вірного розрахунку після допомоги викладача або проведення розрахунку зі значущими помилками, які підлягають виправленню;

0 балів: відсутність на занятті без поважних причин або списування (плагіат).

2.3 Модульна контрольна робота (МКР)

Ваговий бал $r_{\text{МКР}} = 10$.

Критерії оцінювання МКР:

10 балів: безпомилкова відповідь на всі питання при наявності елементів продуктивного творчого підходу; демонстрація вміння впевненого застосування фундаментальних і фахових знань; вірне виконання розрахунку.

8 балів: недостатньо повна відповідь на всі питання або безпомилкова відповідь на 80% питань; вірне виконання розрахунку

6 балів: безпомилкова відповідь на 50 % питань або неповна відповідь на всі питання з двома - трьома досить суттєвими помилками; вірне виконання розрахунку

4 бали: неповна відповідь на всі питання або безпомилкова відповідь не менше 30 % питань; наявність принципових помилок; вірне виконання розрахунку

0 балів: відсутність на занятті без поважних причин, списування (плагіат) під час контрольної або відмова від виконання контрольної роботи.

2.4 Домашня контрольна робота – семестрове індивідуальне завдання

Ваговий бал $r_{ДКР} = 21$.

21 бал: повне розкриття змісту завдання при бездоганному оформленні до 17 тижня навчання;

19 балів: повне розкриття змісту завдання без зауважень або з незначними зауваженнями при бездоганному оформленні до 17 тижня навчання;

17 балів: достатньо повне розкриття змісту завдання при наявності зауважень не принципового характеру та оформленні до початку сесії;

15 балів: недостатнє або дуже слабке розкриття змісту завдання з великою кількістю помилок і зауважень принципового характеру при оформленні під час сесії;

13 балів: недостатнє або дуже слабке розкриття змісту завдання з великою кількістю помилок і зауважень принципового характеру при оформленні після сесії.

3. Умовою отримання позитивної оцінки з календарного контролю є виконання всіх запланованих на цей час робіт (на час календарного контролю). На першому календарному контролі (8-й тиждень) студент отримує «зараховано», якщо його поточний рейтинг не менше $0,5 \cdot 50 = 25$ балів. На другому календарному контролі (14-й тиждень) студент отримує «зараховано», якщо його поточний рейтинг не менше $0,5 \cdot 80 = 40$ балів.

4. Максимальна сума балів, яку студент може набрати протягом семестру, складає 100 балів:

$$R_c = r_{лек} + r_{лаби} + r_{МКР} + r_{ДКР} = 18 + 51 + 10 + 21 = 100 \text{ балів}$$

Необхідними умовами допуску до заліку є зарахування всіх етапів контрольної роботи, всіх лабораторних робіт, виконання ДКР, а також стартовий рейтинг (r_c) не менше 60 % від R_c , себто: $r_c = 0,6 R_c = 0,6 \times 100 = 60$ балів. Таким чином, студенти, які набрали протягом семестру рейтинг вищий або рівний за $0,6 R_c$ ($R_c \geq 60$ балів), отримують залік.

Для отримання студентом відповідних оцінок його рейтингова оцінка **RD** переводиться згідно з таблицею (див. нижче). Якщо семестровий рейтинг студента дорівнює 60 балам і більше, він має право на отримання заліку «автоматом» (безпосередньо за результатами роботи в семестрі) згідно нижче наведеної таблиці. Якщо рейтинг менше 60 він виконує не виконані відповідно до РСО завдання та, за необхідності, додаткові завдання.

Для отримання студентом відповідних оцінок (ECTS та традиційних) його рейтингова оцінка **RD** переводиться згідно з таблицею.

Таблиця відповідності рейтингових балів оцінкам за університетською шкалою

Кількість балів	Оцінка
100-95	Відмінно
94-85	Дуже добре
84-75	Добре
74-65	Задовільно
64-60	Достатньо
Менше 60	Незадовільно
Не виконані умови допуску	Не допущено

9. Додаткова інформація з дисципліни (освітнього компонента)

Як бонусні зараховуються бали (до 10-ти - відповідно до відсотку завершення) з проходження дистанційного курсу: Experimentation for Improvement. URL: <https://www.coursera.org/learn/experimentation>

Опис матеріально-технічного та інформаційного забезпечення дисципліни

Робочу програму навчальної дисципліни (силабус):

Складено [Концевой С. А.](#);

Ухвалено кафедрою ТНРВ та ЗХТ (протокол № 27 від 24.06.24)

Погоджено методичною комісією факультету/ННІ (протокол № 10 від 21.06.24)